

Supporting Information

Rec. Nat. Prod. 14:1 (2020) 23-30

Docking Studies and Antiprotozoal Activity of Secondary Metabolites Isolated from *Scrophularia syriaca* Benth. Growing in Saudi Arabia

Abdulsalam A. M. Alkhaldi¹, Arafa Musa^{2,3*}, Ehab M. Mostafa^{2,3},

Elham Amin^{4,5} and Harry P. De Koning⁶

¹Department of Biology, College of Science, Jouf University, Sakaka, 2014, Saudi Arabia

²Department of Pharmacognosy, College of Pharmacy, Jouf University, 2014, Sakaka, Saudi Arabia

³Department of Pharmacognosy, Faculty of Pharmacy, Al-Azhar University, Cairo 11371, Egypt

⁴Department of Pharmacognosy, Faculty of Pharmacy, Beni Suef University, Beni Suef, 62514, Egypt

⁵Department of Pharmacognosy, Faculty of Pharmacy, Nahda University, Beni-Suef 62513, Egypt

⁶Institute of Infection, Immunity and Inflammation, College of Medical, Veterinary and Life Sciences, University of Glasgow, Glasgow G12 8TA, UK

Table of Contents	Page
Table S1. ¹ H-NMR spectral data for compounds 1-6 (400 MHz inMethanol- <i>d</i> ₃ , □□ in ppm, <i>J</i> in Hz)	2
Table S2. ¹³ C-NMR spectral data for compounds 1-6 (100 MHz, Methanol- <i>d</i> ₃)	4

Table S1. ¹H-NMR spectral data for compounds 1-6 (400 MHz inMethanol-*d*₄, δ in ppm, *J* in Hz)

Position	1	2	3	4	5	6
1	4.95 (<i>d</i> ,9.6)	5.11 (<i>d</i> ,9.4)	5.09 (<i>d</i> ,9.4)	6.09 (<i>d</i> ,1.3)	5.06 (<i>d</i> ,9.3)	5.01 (<i>d</i> ,9.1)
3	6.4 (<i>dd</i> ,6.1,1.7)	6.41 (<i>dd</i> ,6.2,1.4)	6.41 (<i>dd</i> ,6.1.8)	6.41 (<i>d</i> ,6.4)	6.43 (<i>d</i> ,6.1)	6.46 (<i>d</i> ,6.2)
4	4.95 (<i>d</i> ,6.4)	5.14 (<i>dd</i> ,6.2,4.6)	5.11 (<i>dd</i> ,6,4.6)	4.93 (<i>dd</i> ,6.2,1.6)	5.04 (<i>dd</i> ,6.1,4.5)	5.14 (<i>dd</i> ,6.2,4.5)
5	2.24 (<i>m</i>)	2.35 (<i>m</i>)	2.49 (<i>m</i>)	--	2.38 (<i>m</i>)	2.38 (<i>m</i>)
6	3.88 (<i>d</i> ,7.9)	3.95 (<i>d</i> ,8.3)	3.95 (<i>dd</i> ,8,1.8)	3.73 (<i>dd</i> ,4.2,1.4)	3.99 (<i>d</i> ,8.5)	3.94 (<i>d</i> ,8.6)
7	3.59 (<i>brs</i>)	3.7 (<i>brs</i>)	3.72 (<i>s</i>)	7 _a 1.96 (<i>dd</i> ,17.2,4.4) 7 _b 2.19 (<i>dd</i> ,17.2,1.4)	3.7 (<i>d</i> ,8)	3.7 (<i>brs</i>)
8	--	--	--	--	--	--
9	2.37 (<i>dd</i> ,9.5,7.6)	2.53 (<i>dd</i> ,9.4,7.5)	2.61 (<i>dd</i> ,9.7,7.6)	2.84 (<i>brs</i>)	2.45 (<i>dd</i> ,9.3,8.4)	2.45 (<i>dd</i> ,9.1,8.2)
10	3.64 (<i>d</i> ,3.6)	3.94 (<i>d</i> ,13.4)	3.87 (<i>d</i> ,13.2),	1.44 (3H, <i>s</i>)	3.98 (2H, <i>m</i>)	3.94 (<i>d</i> ,13.3),
	3.87 (<i>d</i> ,11.7)	4.21(<i>m</i>)	4.70 (<i>d</i> ,13.2)			4.28 (<i>d</i> ,13.3)
-CO				--		
-CH ₃				2.04 (3H, <i>s</i>)		
1'	4.6 (<i>d</i> ,7.5)	4.81 (<i>d</i> ,7.6)	4.81 (<i>d</i> ,8)	4.58 (<i>d</i> ,7.9)	4.63 (<i>d</i> ,7.2)	4.82 (<i>d</i> ,9.2)
2'	3.03 (<i>m</i>)	3.29 (<i>dd</i> ,9.1,7.6)	3.28 (<i>m</i>)	3.19 (<i>m</i>)	3.21 (<i>m</i>)	3.1 (<i>d</i> ,8.1,8.5)
3'	3.14 (<i>m</i>)	3.44 (<i>m</i>)	3.44 (<i>m</i>)	3.38 (<i>m</i>)	3.45 (<i>m</i>)	3.17-3.23 (<i>m</i>)
4'	3.03 (<i>m</i>)	3.33 (<i>m</i>)	3.3 (<i>m</i>)	3.30 (<i>m</i>)	3.19 (<i>m</i>)	3.17-3.23 (<i>m</i>)
5'	3.19 (<i>m</i>)	3.31(<i>m</i>)	3.29 (<i>m</i>)	3.30 (<i>m</i>)	3.24 (<i>m</i>)	3.6 (<i>m</i>)
6'	3.47 (<i>m</i>), 3.66 (<i>m</i>)	3.63 (<i>m</i>), 3.87(<i>m</i>)	3.66(<i>dd</i> ,11.8,6.9), 3.94 (<i>d</i> ,11.8, 1.8)	3.88 (<i>m</i>), 3.68 (<i>m</i>)	3.69 (<i>m</i>), 3.96(<i>m</i>)	4.32 (<i>dd</i> ,12.2,5.6), 4.64 (<i>dd</i> ,12.2,2.1),
7'	--	--	--	--	--	--
8'	--	--	--	--	--	2.02 (<i>s</i> , 3H)
1''	4.83 (<i>br.s</i>)	5.14 (<i>d</i> ,1.6)	5.05 (<i>d</i> ,1.5)	--	5.12 (<i>d</i> ,1.7)	5.14 (<i>d</i> ,1.6)
2''	3.9 (<i>m</i>)	5.42 (<i>dd</i> ,1.6,3.4)	4.19 (<i>dd</i> ,2.9,1.5)	--	5.27 (<i>dd</i> , <i>J</i> = 1.7,4.2)	5.26 (<i>dd</i> ,1.6,4.1)
3''	3.5 (<i>m</i>)	5.53 (<i>dd</i> , 3.4,10)	5.14 (<i>dd</i> ,2.9,10.3)	--	5.27 (<i>m</i>)	5.26 (<i>m</i>)
4''	3.2 (<i>m</i>)	5.31 (<i>t</i> ,10)	5.27 (<i>m</i>)	--	5.06 (<i>m</i>)	5.26 (<i>m</i>)
5''	3.45 (<i>m</i>)	4.17 (<i>m</i>)	4.16 (<i>m</i>)	--	4.38 (<i>m</i>)	4.11 (<i>m</i>)
6''	1.14 (<i>d</i> ,6.3)	1.29 (<i>d</i> ,6.3)	1.23 (<i>d</i> ,6.4)	--	1.17 (3H, <i>d</i> ,6.0)	1.16 (3H, <i>d</i> ,4.4)
7''	--	--	--	--	--	--
8''	--	2.2 (<i>s</i>)	2.03 (<i>s</i>)	--	2.0 (3H, <i>s</i>)	2.0 (3H, <i>s</i>)
9''	--	--	--	--	--	--
10''	--	--	--	--	2.12 (3H, <i>s</i>)	2.13 (3H, <i>s</i>)
1'''	--	--	--	--	--	--
2'''	--	7.56 (<i>dd</i> ,3.2, 6)	7.69 (<i>dd</i> ,8.0,2.1)	--	7.67 (<i>dd</i> ,2.4,7.5)	7.7 (<i>dd</i> ,2.6,7.7)
3'''	--	7.38 (<i>m</i>)	7.43 (<i>m</i>)	--	7.43 (<i>m</i>)	7.4 (<i>m</i>)
4'''	--	7.38 (<i>m</i>)	7.43 (<i>m</i>)	--	7.43 (<i>m</i>)	7.4 (<i>m</i>)
5'''	--	7.38 (<i>m</i>)	7.43 (<i>m</i>)	--	7.43 (<i>m</i>)	7.4(<i>m</i>)
6'''	--	7.56 (<i>dd</i> ,3.2,6)	7.69 (<i>dd</i> ,8.0,2.1)	--	7.67 (<i>dd</i> ,2.4,7.5)	7.7 (<i>dd</i> ,2.6,7.7)
7'''	--	7.72 (<i>d</i> ,16)	7.62 (<i>d</i> ,16)	--	7.61 (<i>d</i> ,16)	7.60 (<i>d</i> ,16)
8'''	--	6.52 (<i>d</i> ,16)	6.55 (<i>d</i> ,16)	--	6.537.60 (<i>d</i> ,16)	6.6 (1H, <i>d</i> ,16)
9'''	--	--	--	--	--	--
1''''	--	---	--	--	--	--
2''''	--	7.53 (<i>dd</i> ,2.8,6)	--	--	--	--
3''''	--	7.38 (<i>m</i>)	--	--	--	--

4''''	--	7.38 (m)	--	--	--	--
5''''	--	7.38 (m)	--	--	--	--
6''''	--	7.53 (dd,2.8,6)	--	--	--	--
7''''	--	7.62 (d,16)	--	--	--	--
8''''	--	6.41 (d,16)	--	--	--	--
9''''	--	--	--	--	--	--

Table S2. ^{13}C -NMR spectral data for compounds 1-6 (100 MHz, Methanol- d_4)

Position	1	2	3	4	5	6
1	93.6	93.8	93.8	93.2	93.6	94.0
3	141.3	141.1	141	142.5	141.6	141.8
4	102.9	101.9	102	105.5	102.3	102.4
5	36.0	35.8	35.8	72.0	35.8	35.8
6	81.8	83.6	82.9	76.3	83.2	83.2
7	57.9	58.1	58	44.7	57.9	57.6
8	65.7	65.2	65.2	87.2	65.9	65.9
9	42.2	41.9	41.9	54.1	42.3	42.2
10	59.3	60	60.1	21.1	59.1	59.2
-CO				172.0		
-CH ₃				20.9		
1'	98.2	98.3	98.9	98.5	98.3	98.7
2'	73.8	73.4	73.4	73.1	73.8	73.7
3'	77.8	76.3	76.3	76.2	77.8	76.5
4'	70.9	70.4	70.4	70.3	70.4	70.7
5'	76.8	77.3	77.2	76.8	76.8	74.2
6'	61.8	61.6	61.6	61.5	61.7	63.3
7'	--	--	--	--	--	170.7
8'	--	--	--	--	--	21.1
1''	99.2	96.4	98.3	--	96.2	96.1
2''	71.0	70.1	68.8	--	69.7	69.5
3''	70.7	69.5	71.9	--	69.3	69.2
4''	72.3	71.1	71.2	--	70.7	70.3
5''	69.2	66.9	66.7	--	66.7	66.1
6''	18.3	16.5	16.4	--	17.6	17.7
7''	--	170.3	170.6	--	170.3	170.3
8''	--	19.4	19.5	--	20.9	20.9
9''	--	--	--	--	170.1	170.1
10''	--	--	--	--	21.1	21.1
1'''	--	134.1*	134.2	--	134.1	134.1
2'''	--	127.98	128	--	128.9	129
3'''	--	128.62	128.7	--	129.4	129.4
4'''	--	130.35	130.3	--	131.3	131.3
5'''	--	128.62	128.7	--	129.4	129.4
6'''	--	127.98	128	--	128.9	129
7'''	--	146.04	145.8	--	146.1	146.1
8'''	--	116.5	117	--	117.3	117.4
9'''	--	165.9	166.3	--	165.7	165.8
1''''	--	134.1	--	--	--	--
2''''	--	128.04	--	--	--	--

3 '' '' '	--	128.69	--	--	--	--
4 '' '' '	--	130.41	--	--	--	--
5 '' '' '	--	128.69	--	--	--	--
6 '' '' '	--	128.04	--	--	--	--
7 '' '' '	--	146.26	--	--	--	--
8 '' '' '	--	116.5	--	--	--	--
9 '' '' '	--	166.3	--	--	--	--
